

Exercício 6: Dinâmica molecular

Data da aula: 8 de novembro (LF) e 7 de novembro (MIEF/MIEBB)

Data limite para entrega do relatório: 22 de novembro (LF) e 21 de novembro (MIEF/MIEBB)

6.1. Gás de Lennard-Jones

Escreva um código de dinâmica molecular, usando o algoritmo de Verlet, para N partículas em três dimensões. Tenha em atenção os seguintes pontos:

1. Considere que a interação entre partículas é uma interação de pares descrita pelo potencial de Lennard Jones:

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right];$$

2. Use um raio de corte de 2.5σ ;
3. Use unidades de simulação (distâncias em unidades de σ , energia em unidades de ε e massa em unidades de m . Ou seja, na prática considera-se que σ , ε e m são unitários;
4. Use passos de tempo pequenos;
5. Considere condições de fronteiras periódicas;
6. Como condições iniciais defina as posições de todas as partículas em dois instantes de tempo seguidos.

Calcule a energia potencial, a energia cinética e energia total em função do tempo. Mostre que a energia total se conserva.

Nota 1: para ser mais fácil testar o código, numa primeira fase, pode considerar partículas inicialmente posicionadas num plano com velocidades iniciais definidas no mesmo plano.

Nota 2: para visualizar simulações em 3D pode usar ferramentas de produção de gráficos (por exemplo, gnuplot) ou ferramentas de produção de vídeos (por exemplo, o *vmd* (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>) ou *paraview* (<http://www.paraview.org/>)).